УДК 519.622

МОДИФИКАЦИЯ МЕТОДА РУНГЕ-КУТТЫ-ФЕЛЬБЕРГА СЕДЬМОГО ПОРЯДКА[1]

А.Е. Новиков
Научный руководитель: член-корреспондент РАН В.В. Шайдуров
Сибирский Федеральный Университет

При моделировании кинетики химических реакций, динамики механических систем, схемотехническом проектировании радиоэлектронных схем и других приложениях возникает проблема решения задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений [1–2]. Учет большого числа факторов при построении математических моделей приводит к расширению класса задач, описываемых жесткими системами [3]. Основные тенденции при построении численных методов связаны с решением систем большой размерности [4]. Сложность практических задач приводит к возрастающим требованиям к вычислительным алгоритмам. Для явных методов шаг интегрирования h ограничен неравенством $h|\lambda_{\max}|\le D$, где $\lambda_{\max}$ есть максимальное собственное число матрицы Якоби исходной системы, а положительная постоянная D связана с размером области устойчивости. В последнее время в связи с построением явных методов с расширенными областями устойчивости их возможности трактуются более широко [5]. Здесь построен алгоритм переменного порядка и шага на основе стадий тринадцатистадийного метода Рунге-Кутты-Фельберга [6]. Приведены результаты расчетов, подтверждающие десятикратное повышение эффективности за счет переменного порядка.

Для численного решения задачи Коши

$$y' = f(t,y),\ y(t_0)=y_0,\ t_0\le t\le t_k, \qquad (1)$$

используются явные формулы типа Рунге-Кутты вида

$$y_{n+1}=y_n+\sum\nolimits_{i=1}^{13} p_{mi}k_i,\ k_i=hf\left(t_n+\alpha_i h, y_n+\sum\nolimits_{j=1}^{i-1}\beta_{ij}k_j\right), \qquad (2)$$

где h – шаг интегрирования. Коэффициенты α_i и β_{ij} не приводятся в силу громоздкости. При значениях коэффициентов

$$\begin{gathered} p_{71}=41/840,\ p_{72}=p_{73}=p_{74}=p_{75}=0,\ p_{76}=34/105,\ p_{77}=p_{78}=9/35,\\ p_{79}=p_{7,10}=9/280,\ p_{7,11}=41/840,\ p_{7,12}=p_{7,13}=0 \end{gathered} \qquad (3)$$

схема (2) имеет седьмой порядок точности. Численная формула (2) с коэффициентами

$$\begin{gathered} p_{81}=p_{82}=p_{83}=p_{84}=p_{85}=0,\ p_{86}=34/105,\ p_{87}=p_{88}=9/35,\\ p_{89}=p_{8,10}=9/280,\ p_{8,11}=0,\ p_{8,12}=p_{8,13}=41/840 \end{gathered} \qquad (4)$$

имеет восьмой порядок. Локальная ошибка δ_n метода (2), (3) оценивается по формуле $\delta_n=\sum\nolimits_{i=1}^{13}(p_{8i}-p_{7i})k_i$. В результате для контроля точности вычислений применяется неравенство $|\delta_n||\le\varepsilon$, где $||\bullet||$ – некоторая норма в R^N, ε – требуемая точность расчетов. Учитывая, что $\delta_n=O(h^8)$, шаг h^{ac} по точности выбирается по формуле $h^{ac}=qh$, где q находится из уравнения $q^8||\delta_n||=\varepsilon$. Если $q<1$, то происходит повторное вычисление решения (возврат) с шагом h, равным qh. В противном случае вычисляется приближенное решение, а прогнозируемый шаг вычисляется по формуле $h^{ac}=qh$.

С помощью первых трех стадий метода (2) получена оценка максимального собственного числа матрицы Якоби системы (1), то есть

[1]Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 14-01-00047)

$$v_n = \max_{1\le i\le N}\left|\left(12k_3 - 18k_2 + 6k_1\right)_i / \left(k_2 - k_1\right)_i\right|. \qquad (5)$$

Тогда для контроля устойчивости метода Фельберга можно применять неравенство $v_n \le D$, где постоянная D=5 ограничивает интервал устойчивости. Области устойчивости методов седьмого и восьмого порядков приведены на рис. 1 и 2.

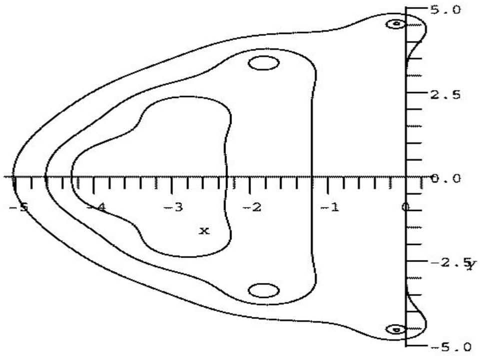

Рис. 1. Область устойчивости метода седьмого порядка

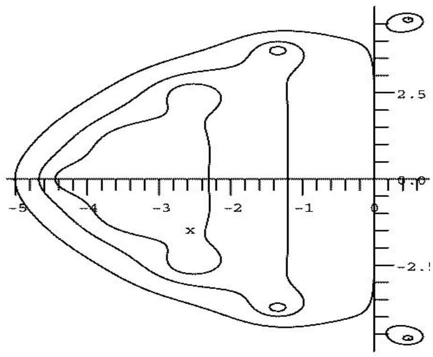

Рис. 2. Область устойчивости метода восьмого порядка

Оценка (5) является грубой, потому что: 1) вовсе не обязательно максимальное собственное число сильно отделено от остальных, 2) в степенном методе применяется мало итераций, 3) дополнительные искажения вносит нелинейность задачи (1). Поэтому здесь контроль устойчивости используется как ограничитель на размер шага интегрирования. В результате прогнозируемый шаг h_{n+1} вычисляется по формуле

$$h_{n+1} = \max\left[h_n, \min\left(h^{ac}, h^{st}\right)\right], \qquad (6)$$

где h^{ac} – шаг по точности, h^{st} – шаг по устойчивости, h_n – последний успешный шаг. Данная формула позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость.

На основе стадий численной схемы (2) построен метод первого порядка точности с более широкой областью устойчивости, коэффициенты которого имеют вид

$$p_1 = -0.38057403389775,\ p_2 = +0.96333718256431\cdot 10^{-1},\ p_3 = +0.89767190586740,$$

$$p_4 = +0.38213980246925,\ p_5 = +0.42473101431975\cdot 10^{-2}, \qquad (7)$$

$$p_6 = +0.18104880747501\cdot 10^{-3},\ p_7 = +0.24835399856329\cdot 10^{-6}.$$

Метод (2), (7) имеет почти максимальный интервал устойчивости, равный приблизительно 90. Область устойчивости приведена на рис. 3. Область устойчивости построенного метода первого порядка точности по вещественной оси примерно в 18 раз шире области устойчивости численной схемы (2), (3). Кроме того, метод первого порядка по числу вычислений правой части задачи (1) почти в два раза дешевле (2), (3). Поэтому для задач, в которых шаг ограничен в основном по устойчивости, предполагаемое теоретическое повышение эффективности в 36 раз.

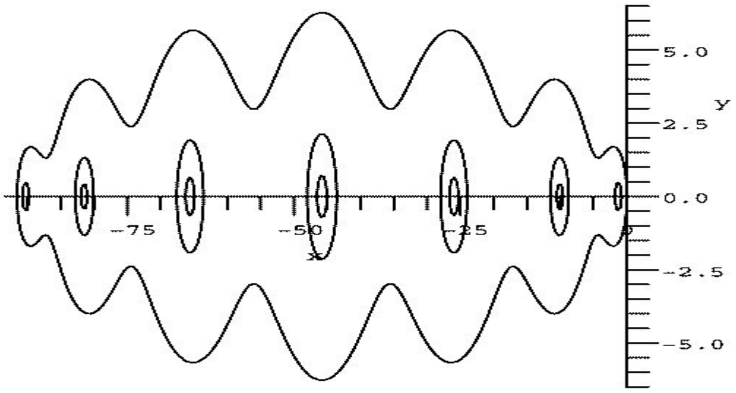

Рис. 3. Область устойчивости метода (2), (7)

Для контроля точности метода (2), (7) можно применять неравенство

$$\left|d\left(1-2c_2\right)\right|\cdot\left\|k_2-k_1\right\|\le\varepsilon\,, \tag{8}$$

где d=27/4, ||•|| – некоторая норма в R^N, ε – требуемая точность расчетов. В построенном неравенстве стадия k_1 вычисляется в точке t_n, а стадия k_2 – в точке (t_n+2h/27). Так как ни одна стадия не вычисляется в точке t_{n+1}, то при быстром изменении решения это может приводить к потере точности вычислений. Поэтому в алгоритме интегрирования контроль (8) используется как предварительный. Окончательное решение по точности принимается проверкой неравенства

$$\left|1-2c_2\right|\cdot\left\|hf\left(y_{n+1}\right)-k_1\right\|\le\varepsilon\,. \tag{9}$$

Использование двух неравенств для контроля точности вычислений позволяет существенно сократить число повторных вычислений решения вследствие нарушения точности расчетов. Дополнительное сокращение возвратов достигается выбором d=1 в формуле (8). Далее, так как интервал устойчивости численной схемы (2), (7) ограничен числом 90, то для ее контроля устойчивости можно применять неравенство $v_n \le 90$, где v_n определяется по формуле (5).

Существенного повышения эффективности можно достигнуть за счет применения каждого метода на том участке, где он наиболее эффективен. В качестве критерия переключения с метода на метод можно использовать неравенство для контроля устойчивости. При расчетах по методу (2), (3) переход на численную схему (2), (7) осуществляется при нарушении неравенства $v_n \le 5$. При расчетах методом первого порядка обратный переход происходит в случае выполнения $v_n \le 5$. Вычисления методом первого порядка сопровождаюся дополнительным (наряду с точностью) контролем неравенства $v_n \le 90$, а шаг выбирается по формуле вида (6).

Ниже через Fel7 обозначен алгоритм интегрирования переменного шага на основе метода Фельберга седьмого порядка, через Fel7st – метод Фельберга с дополнительным контролем устойчивости, а через Fel7vo – алгоритм переменного порядка и шага. Алгоритм Fel7 взят из библиотеки NetLib, он применительно к решению нежестких задач широко известен при высокоточных расчетах. Здесь данный метод применяется для решения жесткой задачи. В качестве тестового примера выбрана простейшая математическая модель описания реакции Белоусова-Жаботинского (орегонатор). Задача является слишком жесткой для явных методов, и поэтому для ее решения применяются L-устойчивые методы. Данный пример выбран для того, чтобы продемонстрировать возможность применения явных методов с дополнительным контролем устойчивости, а также алгоритмов переменного порядка и шага для решения достаточно жестких задач.

Простейшая модель реакции Белоусова-Жаботинского имеет вид

$$y_1' = 77.27(y_2 - y_1 y_2 + y_1 - 8.375 \cdot 10^{-6} y_1^2)\,,\ y_2' = (-y_2 - y_1 y_2 + y_3)/77.27\,,$$

$$y_3' = 0.161(y_1 - y_3)\,,\ t \in [0,300]\,,\ h_0 = 10^{-3}\,,\ y_1(0) = 4\,,\ y_2(0) = 1.1\,,\ y_3(0) = 4\,.$$

В качестве критерия эффективности выбрано число вычислений правой части исходной задачи на интервале интегрирования. Время счета пропорционально данному критерию. Вычислительные затраты приведены в таблице.

Точность расчетов	10^{-2}	10^{-4}	10^{-6}	10^{-8}
Fel7	38 429 365	38 429 235	38 436 138	38 461 306
Fel7st	19 836 063	19 913 816	20 020 143	20 182 863
Fel7vo	**778 253**	**830 494**	**1 046 225**	**1 574 532**

Использование неравенства для контроля устойчивости фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат, потому что оценка максимального собственного числа матрицы Якоби исходной системы осуществляется через ранее вычисленные стадии и не приводит к росту числа вычислений функции *f*. Как правило, для этих целей применяются три первые стадии. Такая оценка получается грубой. Однако применение контроля устойчивости в качестве ограничителя на рост шага и в качестве критерия выбора численной схемы позволяет избежать негативных последствий грубости оценки. Применение на участке установления методов низкого порядка точности с расширенными областями устойчивости позволяет значительно увеличить размер шага интегрирования без увеличения вычислительных затрат. На переходных участках, где определяющую роль играет точность вычислений, эффективными являются методы более высокого порядка точности, но с небольшой областью устойчивости. Комбинирование методов низкого и высокого порядков с помощью неравенства для контроля устойчивости позволяет значительно повысить эффективность расчетов.

1. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи : монография / Э. Хайрер, Г. Ваннер. – М.: Мир, 1999. – 685с.
2. Новиков Е.А. Компьютерное моделирование жестких гибридных систем : монография / Е.А. Новиков, Ю.В. Шорников. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2012. – 450с.
3. Бабенко К.И. Основы численного анализа : монография / К.И. Бабенко. – М. Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. – 744с.
4. Свешников А.Г. Линейные и нелинейные уравнения Соболевского типа : монография / А.Г. Свешников, А.Б. Альшин, М.О. Корпусов, Ю.Д. Плетнер. – М.: Физматлит, 2007. – 734с.
5. Новиков Е.А. Явные методы для жестких систем : монография / Е.А. Новиков. – Новосибирск: Наука, 1997. – 197с.
6. Fehlberg E. Klassische Runge–Kutta–Formeln funfter und siebenter Ordnung mit Schrittweitenkontrolle / E. Fehlberg // Computing. – 1969. – № 4. – S. 93–106.